

# VERTRAG ÜBER DIE INTERNATIONALE ZUSAMMENARBEIT AUF DEM GEBIET DES PATENTWESENS

PCT

## INTERNATIONALER VORLÄUFIGER BERICHT ÜBER DIE PATENTIERBARKEIT

(Kapitel II des Vertrags über die internationale Zusammenarbeit auf dem Gebiet des Patentwesens)

REC'D 23 FEB 2006

PCT

Aktenzeichen des Annehmers oder Anwalts B03/0449PC jw	<b>WEITERES VORGEHEN</b>	
siehe Formblatt PCT/IPEA/416		
Internationales Aktenzeichen PCT/EP2004/009269	Internationales Anmeldedatum (Tag/Monat/Jahr) 18.08.2004	Prioritätsdatum (Tag/Monat/Jahr) 19.08.2003
Internationale Patentklassifikation (IPK) oder nationale Klassifikation und IPK C09K11/06, B01J31/22, C07F15/00		
Annehmer <b>BASF AKTIENGESELLSCHAFT et al.</b>		
<p>1. Bei diesem Bericht handelt es sich um den internationalen vorläufigen Prüfungsbericht, der von der mit der internationalen vorläufigen Prüfung beauftragten Behörde nach Artikel 35 erstellt wurde und dem Annehmer gemäß Artikel 36 übermittelt wird.</p> <p>2. Dieser BERICHT umfasst insgesamt 7 Blätter einschließlich dieses Deckblatts.</p> <p>3. Außerdem liegen dem Bericht ANLAGEN bei; diese umfassen</p> <p>a. <input checked="" type="checkbox"/> (<i>an den Annehmer und das Internationale Büro gesandt</i>) insgesamt 12 Blätter; dabei handelt es sich um</p> <ul style="list-style-type: none"> <li><input type="checkbox"/> Blätter mit der Beschreibung, Ansprüchen und/oder Zeichnungen, die geändert wurden und diesem Bericht zugrunde liegen, und/oder Blätter mit Berichtigungen, denen die Behörde zugestimmt hat (siehe Regel 70.16 und Abschnitt 607 der Verwaltungsvorschriften).</li> <li><input type="checkbox"/> Blätter, die frühere Blätter ersetzen, die aber aus den in Feld Nr. 1, Punkt 4 und im Zusatzfeld angegebenen Gründen nach Auffassung der Behörde eine Änderung enthalten, die über den Offenbarungsgehalt der internationalen Anmeldung in der ursprünglich eingereichten Fassung hinausgeht.</li> </ul> <p>b. <input type="checkbox"/> (<i>nur an das Internationale Büro gesandt</i>)&gt; insgesamt (bitte Art und Anzahl der/des elektronischen Datenträger(s) angeben), der/die ein Sequenzprotokoll und/oder die dazugehörigen Tabellen enthält/enthalten, nur in computerlesbarer Form, wie im Zusatzfeld betreffend das Sequenzprotokoll angegeben (siehe Abschnitt 802 der Verwaltungsvorschriften).</p>		
<p>4. Dieser Bericht enthält Angaben zu folgenden Punkten:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li><input checked="" type="checkbox"/> Feld Nr. I Grundlage des Bescheids</li> <li><input type="checkbox"/> Feld Nr. II Priorität</li> <li><input type="checkbox"/> Feld Nr. III Keine Erstellung eines Gutachtens über Neuheit, erforderliche Tätigkeit und gewerbliche Anwendbarkeit</li> <li><input checked="" type="checkbox"/> Feld Nr. IV Mangelnde Einheitlichkeit der Erfindung</li> <li><input checked="" type="checkbox"/> Feld Nr. V Begründete Feststellung nach Artikel 35(2) hinsichtlich der Neuheit, der erforderlichen Tätigkeit und der gewerblichen Anwendbarkeit; Unterlagen und Erklärungen zur Stützung dieser Feststellung</li> <li><input type="checkbox"/> Feld Nr. VI Bestimmte angeführte Unterlagen</li> <li><input type="checkbox"/> Feld Nr. VII Bestimmte Mängel der internationalen Anmeldung</li> <li><input type="checkbox"/> Feld Nr. VIII Bestimmte Bemerkungen zur internationalen Anmeldung</li> </ul>		
Datum der Einreichung des Antrags  17.06.2005	Datum der Fertigstellung dieses Berichts  22.02.2006	
Name und Postanschrift der mit der internationalen Prüfung beauftragten Behörde   Europäisches Patentamt D-80298 München Tel. +49 89 2399 - 0 Tx: 523656 epmu d Fax: +49 89 2399 - 4465	Bevollmächtigter Bediensteter  Doslik, N Tel. +49 89 2399-7873	

BEST AVAILABLE COPY

**INTERNATIONALER VORLÄUFIGER BERICHT  
ÜBER DIE PATENTIERBARKEIT**

Internationales Aktenzeichen  
PCT/EP2004/009269

**Feld Nr. I Grundlage des Berichts**

1. Hinsichtlich der **Sprache** beruht der Bericht auf der internationalen Anmeldung in der Sprache, in der sie eingereicht wurde, sofern unter diesem Punkt nichts anderes angegeben ist.
  - Der Bericht beruht auf einer Übersetzung aus der Originalsprache in die folgende Sprache, bei der es sich um die Sprache der Übersetzung handelt, die für folgenden Zweck eingereicht worden ist:
    - internationale Recherche (nach Regeln 12.3 und 23.1 b))
    - Veröffentlichung der internationalen Anmeldung (nach Regel 12.4)
    - internationale vorläufige Prüfung (nach Regeln 55.2 und/oder 55.3)
2. Hinsichtlich der **Bestandteile\*** der internationalen Anmeldung beruht der Bericht auf (*Ersatzblätter, die dem Anmeldeamt auf eine Aufforderung nach Artikel 14 hin vorgelegt wurden, gelten im Rahmen dieses Berichts als "ursprünglich eingereicht" und sind ihm nicht beigelegt*):

**Beschreibung, Seiten**

1-63, *in der ursprünglich eingereichten Fassung*

**Ansprüche, Nr.**

1-18, *eingegangen am 17.06.2005 mit Schreiben vom 17.06.2005*

**Zeichnungen, Blätter**

1/2, 2/2, *in der ursprünglich eingereichten Fassung*

einem Sequenzprotokoll und/oder etwaigen dazugehörigen Tabellen - siehe Zusatzfeld betreffend das Sequenzprotokoll

3.  Aufgrund der Änderungen sind folgende Unterlagen fortgefallen:

Beschreibung: Seite  
 Ansprüche: Nr.  
 Zeichnungen: Blatt/Abb.  
 Sequenzprotokoll (*genaue Angaben*):  
 etwaige zum Sequenzprotokoll gehörende Tabellen (*genaue Angaben*):

4.  Dieser Bericht ist ohne Berücksichtigung (von einigen) der diesem Bericht beigefügten und nachstehend aufgelisteten Änderungen erstellt worden, da diese aus den im Zusatzfeld angegebenen Gründen nach Auffassung der Behörde über den Offenbarungsgehalt in der ursprünglich eingereichten Fassung hinausgehen (Regel 70.2 c)).

Beschreibung: Seite  
 Ansprüche: Nr.  
 Zeichnungen: Blatt/Abb.  
 Sequenzprotokoll (*genaue Angaben*):  
 etwaige zum Sequenzprotokoll gehörende Tabellen (*genaue Angaben*):

\* Wenn Punkt 4 zutrifft, können einige oder alle dieser Blätter mit der Bemerkung "ersetzt" versehen werden.

**INTERNATIONALER VORLÄUFIGER BERICHT  
ÜBER DIE PATENTIERBARKEIT**

Internationales Aktenzeichen  
PCT/EP2004/009269

---

**Feld Nr. IV Mangelnde Einheitlichkeit der Erfindung**

---

1.  Auf die Aufforderung zur Einschränkung der Ansprüche oder zur Zahlung zusätzlicher Gebühren hat der Anmelder:
  - die Ansprüche eingeschränkt.
  - zusätzliche Gebühren entrichtet.
  - zusätzliche Gebühren unter Widerspruch entrichtet.
  - weder die Ansprüche eingeschränkt noch zusätzliche Gebühren entrichtet.
2.  Die Behörde hat festgestellt, daß das Erfordernis der Einheitlichkeit der Erfindung nicht erfüllt ist, und hat gemäß Regel 68.1 beschlossen, den Anmelder nicht zur Einschränkung der Ansprüche oder zur Zahlung zusätzlicher Gebühren aufzufordern.
3. Die Behörde ist der Auffassung, daß das Erfordernis der Einheitlichkeit der Erfindung nach den Regeln 13.1, 13.2 und 13.3
  - erfüllt ist.
  - aus folgenden Gründen nicht erfüllt ist:
4. Daher ist der Bericht für die folgenden Teile der internationalen Anmeldung erstellt worden:
  - alle Teile.
  - die Teile, die sich auf die Ansprüche mit folgenden Nummern beziehen: .

---

**Feld Nr. V Begründete Feststellung nach Artikel 35 (2) hinsichtlich der Neuheit, der erfinderischen Tätigkeit und der gewerblichen Anwendbarkeit; Unterlagen und Erklärungen zur Stützung dieser Feststellung**

---

1. Feststellung  
Neuheit (N) Ja: Ansprüche 1-18  
Nein: Ansprüche  
Erfinderische Tätigkeit (IS) Ja: Ansprüche 1-8,15-18  
Nein: Ansprüche 9-14  
Gewerbliche Anwendbarkeit (IA) Ja: Ansprüche: 1-18  
Nein: Ansprüche:

2. Unterlagen und Erklärungen (Regel 70.7):

siehe Beiblatt

**Zu Punkt V**

**Begründete Feststellung hinsichtlich der Neuheit, der erfinderischen Tätigkeit und der gewerblichen Anwendbarkeit; Unterlagen und Erklärungen zur Stützung dieser Feststellung**

Es wird auf die folgenden Dokumente verwiesen:

- D1: S. LAI ET.AL.: "Carbene and isocyanide ligation at luminescent cyclometalated 6-phenyl-2,2'-bipyridyl platinum (II) complexes: structural and spectroscopic studies" ORGANOMETALLICS, Bd. 18, 1999, Seiten 3327-336, XP002309654
- D2: Q. LIU ET.AL.: "Synthesis, crystal structure and photophysical properties of N-heterocyclic carbene Pd(II), Pt(II) complexes and iodine adduct" POLYHEDRON, Bd. 22, 15. Juni 2003 (2003-06-15), Seiten 1515-1521, XP002309655
- D3: LAI S-W ET AL: "Luminescent metal complexes derived from carbene and related ligands: tuning excited-state properties with metal-carbon multiple bonds" JOURNAL OF ORGANOMETALLIC CHEMISTRY, ELSEVIER-SEQUOIA S.A. LAUSANNE, CH, Bd. 617-618, 15. Januar 2001 (2001-01-15), Seiten 133-140, XP004315036 ISSN: 0022-328X
- D4: C.M. CHE ET.AL.: "[{Pt(CN)(C<sub>10</sub>H<sub>21</sub>N<sub>4</sub>)<sub>6</sub>}]: A luminescent hexanuclear platinum(II) macrocycle containing chelating dicarbene and bridging cyanide ligands" ANGEW.CHEM.INT.ED., Bd. 37, Nr. 1/2, 1998, Seiten 182-184, XP002309656
- D5: W. XUE ET.AL.: "Spectroscopic and excited-state properties of luminescent rhenium (I) N-heterocyclic carbene complexes containing aromatic diimine ligands" ORGANOMETALLICS, Bd. 17, 1998, Seiten 1622-1630, XP002309657
- D6: P. HITCHCOCK ET.AL.: "Synthesis of homoleptic tris(organo-chelate)iridium(III) complexes by spontaneous ortho-metallation of electronrich olefin-derived N,N'-diarylcarbene ligands and the X-ray structures of fac-[6H<sub>3</sub>Me-p]<sub>3</sub>] and mer-6H<sub>3</sub>Me-p}<sub>2</sub> {C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>Me-p}Cl (a product of HCl cleavage)" JOURNAL OF ORGANOMETALLIC CHEMISTRY, Bd. 239, 1982, Seiten C26-C30, XP002309658
- D7: S. GRÜNDEMANN ET.AL.: "Abnormal ligand binding and reversible ring hydrogenation in the reaction of imidazolinum salts with IrH<sub>5</sub>(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>" J. AM.

**INTERNATIONALER VORLÄUFIGER  
BERICHT ZUR PATENTIERBARKEIT  
(BEIBLATT)**

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP2004/009269

CHEM. SOC., Bd. 124, 2002, Seiten 10473-10481, XP002309428

D8: A. CHIANESE ET.AL.: "Rhodium and iridium complexes of N-heterocyclic carbenes via transmetalation: structure and dynamics" ORGANOMETALLICS, Bd. 22, 13. März 2003 (2003-03-13), Seiten 1663-1667, XP002309659

D9: T. WESKAMP ET.AL.: "N-heterocyclic carbenes: novel ruthenium-alkylidene complexes" JOURNAL OF ORGANOMETALLIC CHEMISTRY, Bd. 582, 1999, Seiten 362-365, XP002309660

D10: K. COLEMAN ET.AL.: "Silver(I) complex of a new imino-N-heterocyclic carbene and ligand transfer to palladium(II) and rhodium(I)" DALTON TRANS., 18. Juni 2003 (2003-06-18), Seiten 2917-2922, XP002309661

D11: R. DOUTHWAITE ET.AL.: "Cationic and neutral palladium(II) methyl complexes of di-N-heterocyclic carbenes" J.CHEM. SOC., DALTON TRANS., 2002, Seiten 1386-1390, XP002309662

D12: T. J. FOLEY ET AL.: "Facile preparation and photophysics of near-infrared luminescent lanthanide(III) monoporphyrinate complexes" INORG. CHEM.

July 2003, 42, Seiten 5023-5032

D13: W. LU ET. AL.: "[(C<sup>n</sup>N<sup>n</sup>N)Pt(C≡C)<sub>n</sub>R] (HC<sup>n</sup>N<sup>n</sup>N = 6-aryl-2,2'-bipyridine, n= 1-4, R= aryl, SiMe<sub>3</sub>) as a new class of light-emitting materials and their applications in electrophosphorescent devices" CHEM. COMMUN., 2002, Seiten 206-207

Die Dokumente D12-D13 wurden im internationalen Recherchenbericht nicht angegeben. Kopien der Dokumente liegen bei.

1. Neuheit gemäss Artikel 33(2) PCT

Die vorliegende Anmeldung erfüllt die Erfordernisse des Artikels 33(1) PCT, da der Gegenstand der Ansprüche 1-18 im Sinne von Artikel 33(2) PCT neu ist.

Das Dokument D12 wird als nächstliegender Stand der Technik gegenüber dem Gegenstand des Anspruchs 1 angesehen. Es offenbart einen neutralen Organometall-Komplex mit Carbenliganden zum Einsatz in elektrolumineszenten Vorrichtungen. (S. 5027,5032).

Der Gegenstand des Anspruchs 1 unterscheidet sich von D12 durch eine andere Auswahl

des Metallatoms.

Der Gegenstand des Anspruchs 1 ist somit neu (Artikel 33(2) PCT).

Das Dokument D6 wird als nächstliegender Stand der Technik gegenüber dem Gegenstand des Anspruchs 9 angesehen. Es offenbart Ir(III)-Komplexe mit drei monoanionischen Carbenliganden. Der Gegenstand des Anspruchs 9 unterscheidet sich von D6 durch eine fehlende Substitution der CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-Brücke des NHC-Liganden.

Der Gegenstand des Anspruchs 9 ist somit neu (Artikel 33(2) PCT).

Die Ansprüche 2-8 und 10-18 sind abhängige Ansprüche von Anspruch 1 und 9, bzw. haben einen Rückbezug zu diesen und erfüllen damit ebenfalls die Erfordernisse des PCT in bezug auf Neuheit.

## 2. Erfinderische Tätigkeit gemäss Artikel 33(3) PCT

Die mit der vorliegenden Erfindung in Anspruch 1 zu lösende Aufgabe kann darin gesehen werden, neutrale Übergangsmetall-Komplexe mit mindestens einem Carbenliganden in OLEDs zu verwenden.

Der nächstliegende Stand der Technik D12 verwendet neutrale Lanthanid-Komplexe mit mindestens einem Carbenliganden in OLEDs (S.5023-5032). Lanthanide haben im Vergleich mit Übergangsmetallen (wie in Anspruch 1 beansprucht) sich unterscheidende Lumineszenz-Eigenschaften. Daher ist es für den Fachmann nicht offensichtlich, als Alternative für Lanthanide Übergangsmetalle im vorliegenden Komplex einzusetzen. Daher wird der Anspruch 1 als erfinderisch angesehen.

Die in Anspruch 9 zu lösende Aufgabe kann darin gesehen werden, neutrale Übergangsmetall-Komplexe mit mindestens zwei Carbenliganden zur Verfügung zu stellen. Der nächste Stand der Technik D6 offenbart einen Ir(III)-Komplex mit drei Carbenliganden. Eine Substitution der CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>-Brücke des NHC-Liganden ist eine gängige und naheliegende Massnahme, die der Fachmann ohne erfinderisches Zutun den Umständen entsprechend auswählen würde.

Daher wird der Anspruch 9 nicht als erfinderisch angesehen.

**INTERNATIONALER VORLÄUFIGER  
BERICHT ZUR PATENTIERBARKEIT  
(BEIBLATT)**

Internationales Aktenzeichen

PCT/EP2004/009269

Die abhängigen Ansprüche 10-14 enthalten keine Merkmale, die in Kombination mit den Merkmalen irgendeines Anspruchs, auf den sie sich beziehen, die Erfordernisse des PCT in bezug auf erforderliche Tätigkeit erfüllen.

Die in den abhängigen Ansprüchen 2-8 und sowie auch in Ansprüchen 15-18 enthaltene Merkmalskombination ist aus dem vorliegenden Stand der Technik weder bekannt, noch wird sie durch ihn nahegelegt. Daher werden diese Ansprüche als erforderlich angesehen.

### Geänderte Patentansprüche

- 5 1. Verwendung von neutralen Übergangsmetall-Komplexen der allgemeinen Formel  
 (I) enthaltend mindestens einen Carbenliganden in organischen Lichtemittierenden Dioden



10

worin die Symbole die folgenden Bedeutungen aufweisen:

- M<sup>1</sup> Metallatom ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Co, Rh, Ir, Nb, Pd, Pt, Fe, Ru, Os, Cr, Mo, W, Mn, Tc, Re, Cu, Ag und Au in jeder für das entsprechende Metallatom möglichen Oxidationsstufe;
- carben Carbenligand, der neutral oder monoanionisch und mono-, bi- oder tridentat sein kann; bei dem Carbenliganden kann es sich auch um einen Bis- oder Triscarbenliganden handeln;
- L mono- oder dianionischer Ligand, der mono- oder bidentat sein kann;
- K neutraler mono- oder bidentater Ligand ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Phosphinen; Phosphonaten und Derivaten davon, Arsenaten und Derivaten davon; Phosphiten; CO; Pyridinen; Nitrilen und konjugierten Dienen, die einen  $\pi$ -Komplex mit M<sup>1</sup> bilden;
- n Zahl der Carbenliganden, wobei n mindestens 1 ist und die Carbenliganden in dem Komplex der Formel I bei n > 1 gleich oder verschieden sein können;
- m Zahl der Liganden L, wobei m 0 oder  $\geq 1$  sein kann und die Liganden L bei m > 1 gleich oder verschieden sein können;
- o Zahl der Liganden K, wobei o 0 oder  $\geq 1$  sein kann und die Liganden K bei o > 1 gleich oder verschieden sein können;

wobei die Summe  $n + m + o$  von der Oxidationsstufe und Koordinationszahl des eingesetzten Metallatoms und von der Zähligkeit der Liganden carben, L und K sowie von der Ladung der Liganden carben und L abhängig ist, mit der Bedingung, dass  $n$  mindestens 1 ist.

5

2. Verwendung nach Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, dass die neutralen Übergangsmetallkomplexe der Formel I als Emittermoleküle eingesetzt werden.

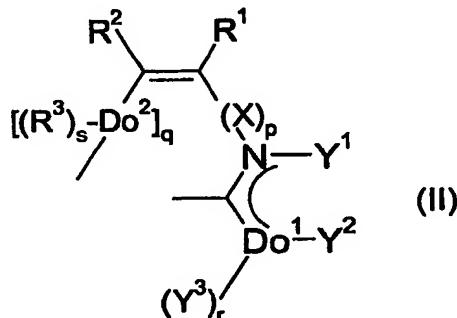
10

3. Verwendung nach Anspruch 1 oder 2, dadurch gekennzeichnet, dass der mindestens eine Carbenligand bidentat ist.

15

4. Verwendung nach einem der Ansprüche 1 bis 3, dadurch gekennzeichnet, dass der mindestens eine Carbenligand monoanionisch ist.

5. Verwendung nach einem der Ansprüche 1 bis 4, dadurch gekennzeichnet, dass der mindestens eine Carbenligand die folgende Formel II aufweist



20

worin die Symbole die folgenden Bedeutungen aufweisen:

$\text{Do}^1$  Donoratom ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus C, P, N, O und S; bevorzugt P, N, O und S;

25

$\text{Do}^2$  Donoratom ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus C, N, P, O und S;

r 2, wenn  $\text{Do}^1$  C ist, 1, wenn  $\text{Do}^1$  N oder P ist und 0, wenn  $\text{Do}^1$  O oder S ist;

30

s 2, wenn  $\text{Do}^2$  C ist, 1, wenn  $\text{Do}^2$  N oder P ist und 0, wenn  $\text{Do}^2$  O oder S ist;

X Spacer ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Silylen, Alkylen, Arylen, Heteroarylen oder Alkenylen;

5 p 0 oder 1;

q 0 oder 1;

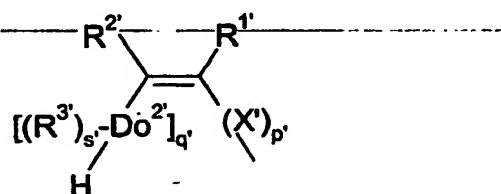
10 Y<sup>1</sup>, Y<sup>2</sup> jeweils unabhängig voneinander Wasserstoff oder eine kohlenstoffhaltige Gruppe ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl- und Alkenylgruppen;

oder

Y<sup>1</sup> und Y<sup>2</sup> bilden gemeinsam eine Brücke zwischen dem Donoratom Do<sup>1</sup> und dem Stickstoffatom N die mindestens zwei Atome aufweist, wovon mindestens eines ein Kohlenstoffatom ist.

15

Y<sup>3</sup> ein Wasserstoff-, Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl- oder Alkenylrest;  
oder



20

wobei Do<sup>2</sup>, q, s, R<sup>3</sup>, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, X und p unabhängig die gleichen Bedeutungen wie Do<sup>2</sup>, q, s, R<sup>3</sup>, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, X und p aufweisen;

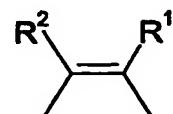
25

R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup> unabhängig voneinander Wasserstoff, Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl- oder Alkenylreste,

oder

R<sup>1</sup> und R<sup>2</sup> bilden gemeinsam eine Brücke mit insgesamt drei bis fünf Atomen, wovon ein oder zwei Atome Heteroatome sein können und die restlichen Atome Kohlenstoffatome sind, so dass die Gruppe

30

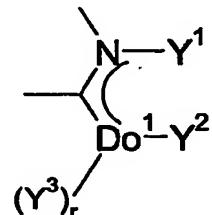


einen fünf- bis siebengliedrigen Ring bildet, der gegebenenfalls - neben der bereits vorhandenen Doppelbindung - eine - oder im Falle eines

sechs- oder siebengliedrigen Rings - zwei weitere Doppelbindungen aufweisen kann und gegebenenfalls mit Alkyl- oder Arylgruppen substituiert sein kann und gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten kann;

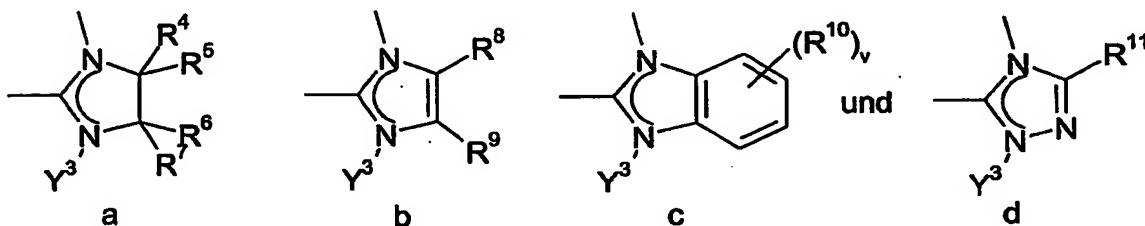
- 5       $R^3$       Wasserstoff, ein Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl- oder Alkenylrest.

## **6. Verwendung nach Anspruch 5, dadurch gekennzeichnet, dass die Gruppierung**



10

ausgewählt ist aus der Gruppe bestehend aus



15

worin die Symbole die folgenden Bedeutungen aufweisen:

$R^4, R^5, R^6,$   
 $R^7, R^8, R^9$

und R<sup>11</sup> Wasserstoff, Alkyl, Aryl, Heteroaryl oder Alkenyl oder ein Substituent mit  
Donor- oder Akzeptorwirkung;

- ## 20 Donor- oder Akzeptorwirkung;

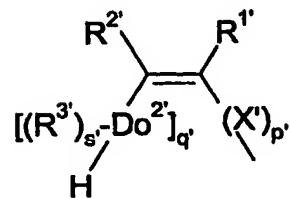
**R<sup>10</sup>** Alkyl, Aryl, Heteroaryl oder Alkenyl oder jeweils 2 Reste R<sup>10</sup> bilden gemeinsam einen anellierten Ring, oder R<sup>10</sup> bedeutet einen Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

25

- v 0 bis 4, wobei, wenn v 0 ist, die vier Kohlenstoffatome des Arylrests in Formel c, die gegebenenfalls mit R<sup>10</sup> substituiert sind, Wasserstoffatome tragen;

30       $\gamma^3$       ein Wasserstoff-, Alkyl-, Aryl-, Heteraryl- oder Alkenylrest;

oder

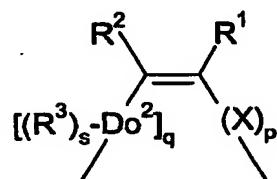


5

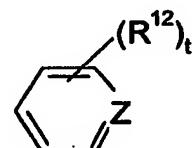
wobei  $\text{Do}^2$ ,  $q$ ,  $s$ ,  $R^3$ ,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $X'$  und  $p'$  unabhängig die gleichen Bedeutungen wie  $\text{Do}^2$ ,  $q$ ,  $s$ ,  $R^3$ ,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $X$  und  $p$  aufweisen.

7. Verwendung nach Anspruch 5 oder 6, dadurch gekennzeichnet, dass die Gruppierung

10



die Struktur



15

bedeutet,

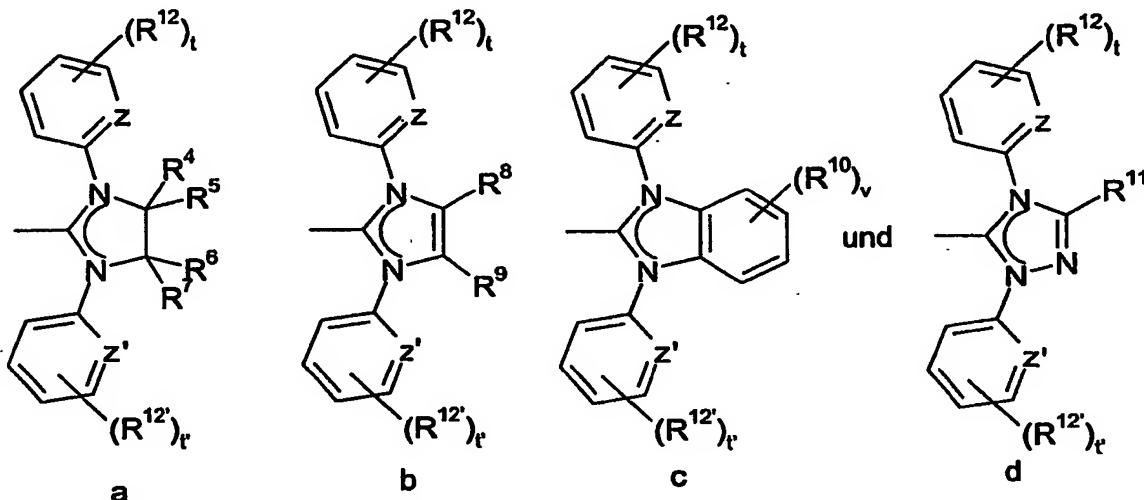
worin die Symbole die folgenden Bedeutungen aufweisen:

20 Z CH oder N, wobei Z in o-, m- oder p-Position zur Verknüpfungsstelle der Gruppierung mit dem Carbenliganden angeordnet sein kann;

25  $R^{12}$  ein Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkenylrest, oder jeweils 2 Reste  $R^{12}$  bilden gemeinsam einen anellierten Ring, der gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten kann, oder  $R^{12}$  bedeutet einen Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

t 0 bis 3, wobei, wenn t > 1 ist, die Reste R<sup>12</sup> gleich oder verschieden sein können.

8. Verwendung nach einem der Ansprüche 5 bis 7, dadurch gekennzeichnet, dass  
5 der mindestens eine Carbenligand ausgewählt ist aus der Gruppe bestehend aus



worin die Symbole die folgenden Bedeutungen aufweisen:

10 Z, Z' gleich oder verschieden CH oder N

R<sup>12</sup>, R<sup>12'</sup> gleich oder verschieden ein Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl- oder Alkenylrest,  
oder jeweils 2 Reste R<sup>12</sup> bzw. R<sup>12'</sup> bilden gemeinsam einen anellierten  
Ring, der gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten kann,  
oder R<sup>12</sup> bzw. R<sup>12'</sup> bedeutet einen Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

t und t' gleich oder verschieden 0 bis 3, wobei, wenn t bzw. t' > 1 ist, die Reste  
R<sup>12</sup> bzw. R<sup>12'</sup> gleich oder verschieden sein können;

20 R<sup>4</sup>, R<sup>5</sup>, R<sup>6</sup>,  
R<sup>7</sup>, R<sup>8</sup>, R<sup>9</sup>

und R<sup>11</sup> Wasserstoff, Alkyl, Aryl, Heteroaryl oder Alkenyl oder ein Rest mit Do-  
nor- oder Akzeptorwirkung;

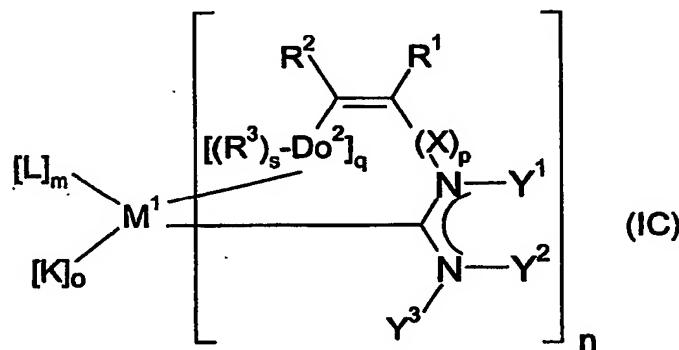
25 R<sup>10</sup> Alkyl, Aryl, Heteroaryl oder Alkenyl oder jeweils 2 Reste R<sup>10</sup> bilden ge-  
meinsam einen anellierten Ring, der gegebenenfalls mindestens ein He-

teroatom enthalten kann, oder  $R^{10}$  bedeutet einen Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

- v 0 bis 4, wobei, wenn v 0 ist, die vier Kohlenstoffatome des Arylrests in  
 5 Formel c, die gegebenenfalls mit  $R^{10}$  substituiert sind, Wasserstoffatome tragen.

9. Neutrale Übergangsmetallkomplexe der allgemeinen Formel IC

10



worin die Symbole die folgenden Bedeutungen aufweisen:

- M<sup>1</sup> Ru, Rh, Ir, Pt in jeder für das entsprechende Metallatom möglichen Oxidationsstufe;  
 15 L mono- oder dianionischer Ligand, der mono- oder bidentat sein kann  
 K neutraler mono- oder bidentater Ligand;  
 20 n Zahl der Carbenliganden, wobei n mindestens 2 ist und die Carbenliganden in dem Übergangsmetall-Komplex gleich oder verschieden sein können;  
 m Zahl der Liganden L, wobei m 0 oder  $\geq 1$  sein kann und die Liganden L bei m > 1 gleich oder verschieden sein können;  
 25 o Zahl der Liganden K, wobei o 0 oder  $\geq 1$  sein kann und die Liganden K bei o > 1 gleich oder verschieden sein können;  
 30

wobei die Summe  $n + m + o$  von der Oxidationsstufe und Koordinationszahl des eingesetzten Metallatoms und der Zähligkeit der Liganden sowie von der Ladung der Liganden abhängig ist, mit der Bedingung, dass  $n$  mindestens 2 ist;

5       $\text{Do}^2$     Donoratom ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus C, N, P, O und S;

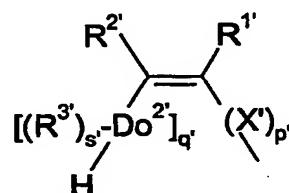
s       2, wenn  $\text{Do}^2$  C, ist 1, wenn  $\text{Do}^2$  N oder P ist und 0, wenn  $\text{Do}^2$  O oder S ist;

10     X       Spacer ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus Silylen, Alkylen, Arylen, Heteroarylen oder Alkenylen;

p       0 oder 1;

15     q       0 oder 1;

$\text{Y}^3$     ein Wasserstoff-, Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl- oder Alkenylrest;  
oder



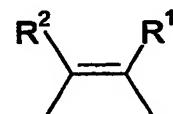
20

wobei  $\text{Do}^2$ ,  $q$ ,  $s$ ,  $R^3$ ,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $X'$  und  $p$  unabhängig die gleichen Bedeutungen wie  $\text{Do}^2$ ,  $q$ ,  $s$ ,  $R^3$ ,  $R^1$ ,  $R^2$ ,  $X$  und  $p$  aufweisen;

25      $R^1, R^2$     unabhängig voneinander Wasserstoff, Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl- oder Alkenylreste,

oder

$R^1$  und  $R^2$  bilden gemeinsam eine Brücke mit insgesamt drei bis fünf Atomen, wovon ein oder zwei Atome Heteroatome sein können und die restlichen Atome Kohlenstoffatome sind, so dass die Gruppe



5

einen fünf- bis siebengliedrigen Ring bildet, der gegebenenfalls - neben der bereits vorhandenen Doppelbindung - eine - oder im Falle eines sechs- oder siebengliedrigen Rings - zwei weitere Doppelbindungen aufweisen kann und gegebenenfalls mit Alkyl- oder Arylgruppen substituiert sein kann und gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten kann oder der Ring ist mit weiteren Ringen, die gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten können, anelliert;

10

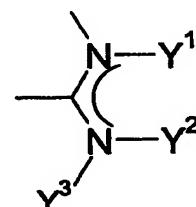
$R^3$  Wasserstoff, ein Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl- oder Alkenylrest;

15

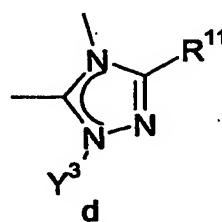
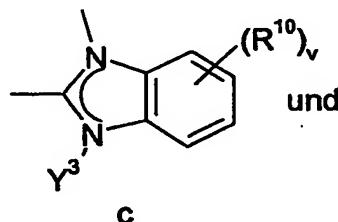
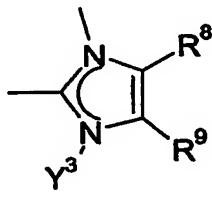
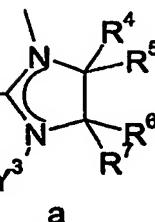
$Y^1, Y^2$  bilden gemeinsam eine Brücke zwischen den Stickstoffatomen N, die mindestens zwei Atome aufweist, wovon mindestens eines ein Kohlenstoffatom ist, wobei die Brücke gesättigt oder ungesättigt sein kann und die mindestens zwei Atome der Brücke substituiert oder unsubstituiert sein können, wobei - für den Fall, dass die Brücke zwei Kohlenstoffatome aufweist und gesättigt ist - mindestens eines der zwei Kohlenstoffatome substituiert ist;

20

10. Übergangsmetallkomplex nach Anspruch 9, dadurch gekennzeichnet, dass die Gruppierung



25



worin die Symbole die folgenden Bedeutungen aufweisen:

30

$R^4, R^5, R^6,$   
 $R^7, R^8, R^9$

und R<sup>11</sup> unabhängig voneinander Wasserstoff, Alkyl, Aryl, Heteroaryl oder Alkenyl, wobei in Formel a mindestens einer der Reste R<sup>4</sup>, R<sup>5</sup>, R<sup>6</sup> oder R<sup>7</sup> nicht Wasserstoff bedeutet oder ein Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

5

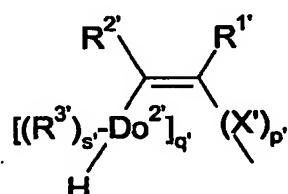
R<sup>10</sup> Alkyl, Aryl, Heteroaryl oder Alkenyl oder jeweils 2 Reste R<sup>10</sup> bilden gemeinsam einen anellierten Ring, der gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten kann, oder R<sup>10</sup> bedeutet einen Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

10

v 0 bis 4, wobei, wenn v 0 ist, die vier Kohlenstoffatome des Arylrests in Formel c, die gegebenenfalls mit R<sup>10</sup> substituiert sind, Wasserstoffatome tragen;

15

Y<sup>3</sup> ein Wasserstoff-, Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl- oder Alkenylrest;  
oder

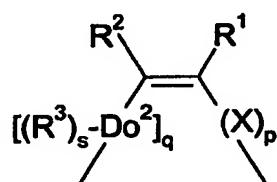


20

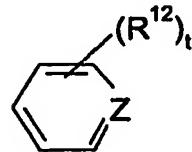
wobei Do<sup>2</sup>, q', s', R<sup>3</sup>, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, X' und p' unabhängig die gleichen Bedeutungen wie Do<sup>2</sup>, q, s, R<sup>3</sup>, R<sup>1</sup>, R<sup>2</sup>, X und p aufweisen.

11. Übergangsmetallkomplex nach Anspruch 9 oder 10, dadurch gekennzeichnet, dass die Gruppierung

25



die Struktur



bedeutet,

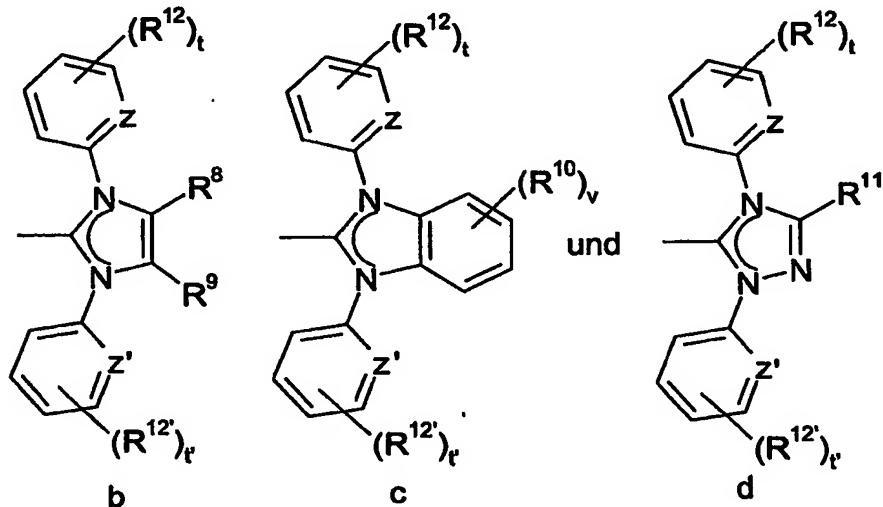
worin die Symbole die folgenden Bedeutungen aufweisen:

5       $Z$       CH oder N, wobei Z in o-, m- oder p-Position zur Verknüpfungsstelle der Gruppierung mit dem Carbenliganden angeordnet sein kann;

10      $R^{12}$     ein Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkenylrest, oder jeweils 2 Reste  $R^{12}$  bilden gemeinsam einen anellierten Ring, der gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten kann, oder  $R^{12}$  bedeutet einen Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

15      $t$       0 bis 3, wobei, wenn  $t > 1$  ist, die Reste  $R^{12}$  gleich oder verschieden sein können.

12. Übergangsmetallkomplex nach einem der Ansprüche 9 bis 11, dadurch gekennzeichnet, dass die mindestens zwei Carbenliganden unabhängig voneinander ausgewählt sind aus der Gruppe bestehend aus



20

worin die Symbole die folgenden Bedeutungen aufweisen:

$Z, Z'$     gleich oder verschieden CH oder N;

25

R<sup>12</sup>, R<sup>12'</sup> gleich oder verschieden ein Alkyl-, Aryl-, Heteroaryl-, Alkenylrest, oder jeweils 2 Reste R<sup>12</sup> bzw. R<sup>12'</sup> bilden gemeinsam einen anellierten Ring, der gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten kann, oder R<sup>12</sup> bzw. R<sup>12'</sup> bedeutet einen Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

5

t und t' gleich oder verschieden 0 bis 3, wobei, wenn t bzw. t' > 1 ist, die Reste R<sup>12</sup> bzw. R<sup>12'</sup> gleich oder verschieden sein können;

R<sup>8</sup>, R<sup>9</sup>

10 und R<sup>11</sup> Wasserstoff, Alkyl, Aryl, Heteroaryl oder Alkenyl oder ein Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

15 R<sup>10</sup> Alkyl, Aryl, Heteroaryl oder Alkenyl, oder jeweils 2 Reste R<sup>10</sup> bilden gemeinsam einen anellierten Ring, der gegebenenfalls mindestens ein Heteroatom enthalten kann, oder R<sup>10</sup> bedeutet einen Rest mit Donor- oder Akzeptorwirkung;

20 v 0 bis 4, wobei, wenn v 0 ist, die vier Kohlenstoffatome des Arylrests in Formel c, die gegebenenfalls mit R<sup>10</sup> substituiert sind, Wasserstoffatome tragen.

13. Übergangsmetallkomplex nach einem der Ansprüche 9 bis 12, dadurch gekennzeichnet, dass M<sup>1</sup> Ir(III) ist, n 3 ist und m und o 0 sind, wobei die drei Carbenliganden bevorzugt gleich sind.

25

14. Verfahren zur Herstellung von Übergangsmetall-Komplexen gemäß einem der Ansprüche 9 bis 13 durch Deprotonierung von dem den entsprechenden Carbenliganden entsprechenden Ligandvorläufern und anschließende Umsetzung mit geeigneten, das gewünschte Metall enthaltenden, Metallkomplexen.

30

15. OLED enthaltend mindestens einen Übergangsmetallkomplex wie in einem der Ansprüche 1 bis 8 definiert oder nach einem der Ansprüche 9 bis 13.

35

16. Licht-emittierende Schicht enthaltend mindestens einen Übergangsmetallkomplex wie in einem der Ansprüche 1 bis 8 definiert oder nach einem der Ansprüche 9 bis 13.

17. OLED enthaltend eine Licht-emittierende Schicht nach Anspruch 14.

18. Vorrichtung ausgewählt aus der Gruppe bestehend aus stationären Bildschirmen wie Bildschirmen von Computern, Fernsehern, Bildschirmen in Druckern, Küchengeräten sowie Reklametafeln, Beleuchtungen, Hinweistafeln und mobilen Bildschirmen wie Bildschirmen in Handys, Laptops, Fahrzeugen sowie Zielanzeigen an Bussen und Bahnen enthaltend ein OLED wie in Anspruch 15 oder 17 definiert.

5